



TITLE:

多孔性配位高分子の合成と性質

AUTHOR(S):

植村, 卓史

CITATION:

植村, 卓史. 多孔性配位高分子の合成と性質. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 46-46

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230746>

RIGHT:

多孔性配位高分子の合成と性質

Synthesis and properties of porous coordination polymers

京都大学大学院工学研究科 合成・生物化学専攻

機能化学講座 植村 卓史

【背景と目的】

吸着材や分離剤として利用されている多孔性材料は、その骨格とゲスト分子との相互作用を制御することで吸着能や分離能の向上が期待できる。多孔性配位高分子は非常に設計性の高い多孔性材料であり、金属イオンと有機配位子の組み合わせを適切に行うことで、細孔の形状、次元性、表面環境を様々に作り分けることが可能である。これらの特徴を利用して実際に系統的に合成した多孔性配位高分子において、異なる吸着能が得られた。これらの細孔の形状や大きさは大差ないため、ゲスト分子と細孔壁の相互作用の違いに起因するものと考えられる。その相互作用の情報を得ることを目的として量子化学計算を行った。このように理論的な解析を行うことで実際の合成の重要な指針を与えることができる。

【検討内容】

今回合成した多孔性配位高分子において、ベンゼンの吸着挙動に顕著な違いが見られたため、それぞれの多孔性配位高分子の有機配位子とベンゼン分子との相互作用の違いが、用いた有機配位子によるものと確認するため、ベンゼン分子を有機配位子近傍で様々な位置に配置し、Gaussian を用いて構造最適化を行った。使用した基底関数は 6-31++G**、計算方法は MP2 である。物理吸着はその吸着エネルギーが小さく分散力が重要となることが多いため、これらの計算条件を用いた。本来は分子間力の評価であり、吸着エネルギーの評価には基底関数重なり誤差 (BSSE) の考慮が必要となるが、今回はエネルギーの評価ではなく配位子による差の有無の確認であるため、BSSE に関しては考慮していない。

【結果と考察】

計算の結果、ベンゼン分子の吸着量が少ない多孔性配位高分子を構成する有機配位子上では、ゲスト分子は安定化を受けないことが明らかとなった。一方、吸着量の大きい配位高分子を構成する有機配位子上では、ベンゼン分子は配位子上で安定化した。このことから、多孔性配位高分子の吸着量は、細孔の形状や大きさだけでなく、細孔表面の環境によっても影響を受けることを確認し、吸着能を制御する上で重要な指針を得ることに成功した。

【発表論文・参考論文】

なし